**Детальний зміст проекту**

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**Назва проекту \_** Розробка методів акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеризації кремнієвих сонячних елементів**\_**

**Науковий керівник проекту \_\_**Оліх Олег Ярославович**\_\_\_\_\_**

**3. Детальний зміст проєкту** (українською та англійською мовами)

3.1 Сучасний стан проблеми (до 2 сторінок)

Для сучасної цивілізації використання відновлюваних джерел енергії є життєво необхідним. Серед різноманітних технологій, спрямованих на вирішення цього завдання, особливе місце займає безпосереднє перетворення сонячного випромінювання на електроенергію. Унікальність такого підходу пов’язана, насамперед, з можливістю задоволення енергетичних потреб без хімічного та теплового забруднення навколишнього середовища, при цьому генерація енергії може відбуватися безпосередньо в околі місця споживання. Як наслідок, на сьогодні сонячна фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх енергетичних технологій у світі.

Понад 90% серед тих десятків гігават енергії, яка виробляється на сучасному етапі внаслідок застосування фотовольтаїчних перетворювачів, припадає на КСЕ. Ці системи створюється з використанням аморфного, полікристалічного чи кристалічного кремнію, причому частка останніх складає близько 40%. Як і для інших напівпровідникових пристроїв, одним з визначальних чинників властивостей КСЕ є система дефектів, зокрема домішковий склад. Зауважимо, що задля здешевлення кінцевої продукції, для створення КСЕ переважно використовуються кристали достатньо невисокої чистоти. Так, однією з найпоширеніших і водночас з найшкідливіших домішок, є атоми заліза та інших перехідних металів. Чимало зусиль науковців спрямовані на розробку на реалізацію технологічних методів, що мають на меті переведення подібних дефектів у електрично-неактивний стан, зокрема внаслідок їхнього гетерування. Проте коефіцієнти корисної дії реальних елементів суттєво нижчі теоретичної межі. З цієї точки зору зрозуміло, що питання розуміння поведінки дефектів та керування їхнім станом мають фундаментальне значення для покращення експлуатаційних характеристик пристроїв.

Загальновизнаними методами зовнішньої активації технологічно функціональних дефектів для управління властивостями напівпровідникових структур є опромінення та термообробка, які, проте, суттєво впливають і на стан кристала загалом. Іншим варіантом модифікації дефектної підсистеми є збудження у кристалі пружних коливань. У літературі, зокрема, показано, що акустичні хвилі у неп’єзоелектричних матеріалах здатні викликати перерозподіл домішок та викликати перебудову окремих точкових дефектів, причому такий спосіб характеризується вибірковістю впливу саме на області з порушеннями періодичності та може бути реалізований при кімнатних температурах. Крім того, показано слушність використання ультразвукового навантаження як додаткового фактору впливу під час технологічних операцій, таких як, наприклад, іонна імплантація. Водночас, наявної інформації недостатньо для формування цілісних уявлень щодо акусто-дефектної взаємодії у напівпровідникових, зокрема кремнієвих, кристалах. Як наслідок, можливості активного ультразвукового впливу не використовуються під час виготовлення сонячних елементів, на відміну від багатьох інших технологічних процесів.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок, у тому числі перехідних металів, у напівпровідникових кристалах та структурах на їхній основі, зокрема сонячних елементах, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих (інфрачервона томографія, електронно-парамагнітний резонанс, нестаціонарна спектроскопія і т.п.), так і непрямих (поверхневої фотоерс, виміри часу життя неосновних носіїв) методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об’єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання. Водночас, чи не найпоширенішим методом характеризації сонячних елементів є вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ), який, зокрема, дозволяє отримати такі фундаментальні параметри даних пристроїв як коефіцієнт корисної дії, напруга холостого ходу та струм короткого замикання. Очевидно, що ці характеристики зокрема та процеси поширення носіїв загалом залежать від наявності електрично активних дефектів і тому існує принципова можливість визначення концентрації останніх за виглядом ВАХ. Однією з найголовніших перепон на шляху розробки подібного зручного для використання та експресного методу є багатопараметричність взаємозв’язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ, які можуть бути визначені шляхом апроксимації експериментальних кривих. Проте в останнє десятиліття методи машинного навчання, спрямовані, зокрема, на вирішення задач, де не передбачається можливість чіткої алгоритмізації, знаходять успішне застосування у різних галузях теоретичної та прикладної фізики. Це дозволяє сподіватись на можливість реалізації вказаного методу характеризації сонячних елементів з використання подібних підходів.

3.2 Новизна проєкту (до 1 сторінки )

Перша частина проєкту пов’язана з експериментальним встановленням закономірностей динамічних акусто-індукованих ефектів у КСЕ. На відміну від багаточисленних попередніх досліджень, у яких акустичні хвилі використовувались як одноосібний інструмент незворотної модифікації неп’єзоелектричної напівпровідникової системи шляхом виведення її зі стабільного (метастабільного) стану, даний проєкт передбачає з’ясування фізичних особливостей та механізмів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані термодинамічними силами у випадку повернення до стану рівноваги. Тобто, проект орієнтований на розробку фізичних основ методу, що базується на використанні комплексних процесів, де ультразвуку відведена роль додаткового чинника та певного підстроювального фактору. Крім того, новизна проєкту пов’язана з вибором об’єкту для вивчення акустичної активності: а саме, домішки атомів перехідних металів та комплексів за їхньою участю у монокристалічному кремнії.

Друга частина проєкту спрямована на розробку нового експрес-методу оцінки концентрації рекомбінаційних центрів, який є простим за реалізацією доповненням стандартної процедури характеризації КСЕ за допомогою ВАХ. Запропонований підхід передбачає низку нових підходів, зокрема використанні величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації рекомбінаційних центрів та застосуванні методів глибокого навчання для встановлення взаємозв’язку вказаних величин.

3.3 Методологія дослідження (до 2 сторінок)

Експериментальна частина проекту має на меті встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов’язаних із атомами перехідних металів та передбачає наступні етапи: 1) підбір реальних КСЕ з базою, легованою бором, та високою концентрацією домішкового заліза; 2) визначення впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на параметри вольт-амперних характеристик (фактор неідеальності, струм насичення, шунтуючий опір, напруга холостого ходу, струм короткого замикання) КСЕ; 3) з’ясування кількісних характеристик кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B; 4) визначення закономірностей змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації в умовах ультразвукового навантаження (повздовжні та поперечні хвилі з частотою (1-30) МГц та інтенсивністю (0,1-1Вт/см2) в температурному діапазоні 290-350 К) та порівняння із беззвуковим випадком; 5) визначення кінетичних характеристик зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з беззвуковим випадком; 6) розробка рекомендацій щодо спрямованої зміни експлуатаційних характеристик КСЕ шляхом акустостимульованої деактивації дефектів.

Вибір домішкової пари Fe-B як безпосереднього об’єкту акусто-керованої модифікації в КСЕ зумовлений декількома факторами. А саме

а) поширеністю даного дефекту у реальних сонячних елементах та його суттєвим впливом на ефективність фотоелектричного перетворення;

б) високим ступенем вивченості параметрів Fe-B;

в) легкістю ініціації перебудови комплексу: пара руйнується під впливом освітленні і відновлюється у темряві, причому характерний час останнього процесу при кімнатних температурах складає десятки хвилин;

г) з компонентами пари пов’язана зміна об’єму кристалу ∆Ω різного знаку: бор є домішкою заміщення з іонним радіусом, який менший ніж для атомів кремнію Sі, тоді як для міжвузлового заліза ∆Ω > 0 – а саме для дефектів такого типу, відповідно до попередніх досліджень, очікується найбільша ефективність акусто-дефектної взаємодії.

Розробка методу характеризації домішкового складу сонячних елементів на основі вимірювання ВАХ передбачається шляхом теоретичного моделювання кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структур з домішками атомів перехідних металів (на прикладі заліза). Ця частина включає розрахунки ВАХ для структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування (1015÷1017 см-3) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі 1010÷1013 см-3 для температурного діапазону 290-340 К. При цьому буде враховано можливість знаходження атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари Fe-B, а також різні зарядові стани дефекту. Розрахунки будуть здійснені за допомогою симулятора сонячних елементів SCAPS 3.3.08 з врахуванням отриманих в результаті аналізу літературних джерел реальних величин та температурних залежностей параметрів кремнію (ширини та звуження забороненої зони, рухливості, теплової швидкості та ефективної маси носіїв, коефіцієнтів власної рекомбінації тощо) та рекомбінаційних центрів. Наступний етап – визначення фактору неідеальності для розглянутих структур шляхом апроксимації отриманих ВАХ. Апроксимація буде здійснюватися відповідно до дво-діодної моделі з використанням мета-еврістичного методу оптимізації Jaya. Останній етап – налаштовування (підбір кількостей схованих шарів та нейронів в них, методу регуляризації, активаційної функції, швидкості навчання) та навчання (на основі масиву даних, отриманих попередньо) штучної нейронної мережі, спроможної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі параметрів сонячного елементу, умов вимірювання ВАХ та отриманого в результаті апроксимації ВАХ значення фактору неідеальності. Орієнтовний інструмент роботи зі штучною нейронною мережею – пакет Keras.

3.4 Обґрунтування спроможності виконання проєкту учасником Конкурсу (до 3 сторінок).

Надається інформація про:

– попередній досвід роботи та науковий доробок наукового керівника та виконавців у галузях, дотичних до поданого проєкту;

– наявну матеріально-технічну базу, обладнання та устаткування, необхідні для виконання проєкту.

Досвід роботи Лозицького О.В. в дослідженні полімерних композитів складає 4 роки. Він є автором 14 публікацій, з яких 12 статей у виданнях, індексованих в Scopus. Експериментальною частиною досліджень є екранувальні властивості одно- і багатошарових композитів в мікрохвильовому діапазоні, визначення діелектричної проникності, електричні властивості композитів з електропровідними, діелектричними і магнітними наповнювачами. Дослідження також включають в себе моделювання екранувальних і електричних властивостей композитів за допомогою машинного навчання з підкріпленням (reinforcement learning). Таким чином, зокрема, визначаються параметри композитів (товщина шарів в багатошарових структурах, склад шарів, вміст наповнювачів) які дадуть потрібні екранувальні властивості. Крім застосування в моделюванні композитів, також наявний досвід використання reinforcement learning на платформі Upwork (1 завершений проект).

3.5 Обґрунтування необхідності придбання за рахунок гранту обладнання та устаткування, а також напрямів їх використання після завершення гранту (Інформація заповнюється у разі подання заявки, яка передбачає придбання обладнання та устаткування для реалізації проєкту) (до 1 сторінки ).

3.6 Обсяг фінансування, необхідний для виконання наукового дослідження (розробки), з відповідним обґрунтуванням за статтями витрат згідно з таблицями у Розділі VII (до 2 сторінок).

3.7 Очікувані результати виконання проєкту (до 1 сторінки ):

а) Опис наукової або науково-технічної продукції (за її наявності), яка буде створена в результаті виконання проєкту (із зазначенням її якісних та кількісних характеристик).

б) Обґрунтування переваг очікуваної наукової або науково-технічної продукції (за її наявності) у порівнянні з існуючими аналогами.

в) Обґрунтування практичної цінності запланованих результатів проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок).

Очікувана в результаті виконання проєкту наукова продукція полягає у

- з’ясуванні фізичних закономірностей та механізмів взаємодії дефектних комплексів, пов’язаних із атомами перехідних металів, у КСЕ з пружними хвилями ультразвукового діапазону;

- оцінці можливостей цілеспрямованого керування характеристиками кремнієвих сонячних елементів шляхом застосування ультразвукового навантаження під час виробництва та розробці рекомендацій щодо практичного використання даного підходу;

- розробці фізичних основ методу оцінки концентрації електрично-активних дефектів у бар’єрних структурах за величиною фактору неідеальності;

- створенні масиву даних (близько 15 тисяч наборів) розрахованих величин фактору неідеальності для кремнієвих структур *n*+-*p*-*p*+ з різними геометричними та електрофізичними характеристиками;

- налаштуванні штучної нейронної мережі для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структурах;

- підготовка не менше 2 статей у міжнародних і вітчизняних фахових журналах;

- підготовка не менше 2 доповідей на конференціях міжнародного рівня.

3.8 Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання проєкту в суспільній практиці (до 1 сторінки ).

Встановлені фізичні закономірності впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови домішкових центрів, пов’язаних з атомами перехідних металів, можуть бути використані для модифікації стандартних технологічних операцій, що використовуються при створенні кремнієвих сонячних елементів, з метою деактивації вказаних дефектів. Визначенні особливості акусто-дефектної взаємодії дозволять налаштувати параметри ультразвукового впливу задля отримання найбільшої ефективності. Крім того, отримані результати можуть стати основою для розробки методів акусто-інженерії дефектів у напівпровідникових пристроях.

З’ясовані кількісні характеристики взаємозв’язку величини фактору неідеальності та концентрації рекомбінаційних центрів можуть бути покладені в основу експрес-методу оцінки домішкового складу реальних сонячних елементів. Налаштована штучна нейронна мережа може бути безпосередньо використана для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структурах, де вказані дефекти є основними рекомбінаційними центрами.

3.9 Можливі ризики, що можуть вплинути на реалізацію проєкту (до 1 сторінки )

Можлива низька акустична активність пари Fe-B стане на заваді ефективної практичної реалізації методу акусто-підсиленого гетерування.

Введення карантину перешкодять виконанню експериментальних досліджень у повному обсязі.